



TITLE:

S-d相互作用について

AUTHOR(S):

大阪, 之雄

CITATION:

大阪, 之雄. S-d相互作用について. 物性研究 1968, 11(2): 108-130

ISSUE DATE:

1968-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86784>

RIGHT:

s - d 相互作用について

東北大通研 大 阪 之 雄

(10月20日受理)

§ 1. 序

s - d 相互作用の理論は、次の二つの研究により、事情が大分明になったと思われる。一つは、Nagaoka¹⁾ による2時間グリーン函数の decoupling 方程式の厳密解²⁾ が得られ、それによる帯磁率、エントロピー等の計算により、逆にこの解が 0°K でどのような状態に対応しているかが次第に明になりつつある。もう一つは、Yoshimori - Yosida³⁾ による most divergence の⁴⁾ 範囲での 0°K での Yosida 理論の完成がなされた事である。Suhl の散乱理論による扱いと、上記の二時間グリーン函数の扱いとは、結果に於て可成^{5) 6) 7)} の類似性が認められる。著者としては、二時間グリーン函数の解の 0°K の状態が、果して Yosida 理論の singlet ground - state を表しているか否かという事を、重大な問題と考える。

ここでは、Yosida 理論に基づいた扱いをなす。

先ず、Yosida 理論の状態を基にして、T - matrix に対する方程式を、⁸⁾ 導出する。それにより、 0°K の電気抵抗の計算を試みる。次に、Nakajima の異常グリーン函数の扱いに、normal 部分の寄与を含めたとと思われる T - matrix に対する式を提案する。この方程式は、 0°K では本質的に、上述の Yosida 理論に基づく T - matrix の式に移行する。

T - matrix の式を定性的に近似し、 $T \gg T_K$ (異常温度) と $T = 0^{\circ}\text{K}$ の間を結ぶ電気抵抗、帯磁率に対する内挿的有限温度の式を提案する。

結論として、エネルギー変数が小さい時の T - matrix の解析的形より、温度で接続した Suhl の解と二時間グリーン函数の解は、singlet ground state とは別な状態になっていると思われる。

この小論の一部は、可成粗っぽい事をしており、その点は、問題の難しさに免じて、かんべんして頂き度い。

§ 2. 0°K に於ける T-matrix の方程式

0°K に於ける Yosida 理論の singlet bound state を $|B\rangle$ で表し、その energy を E_B とする。この基底状態より十分離れた所に、波数 k 、電子スピン σ の電子が入射して来た（または outgoing）状態より作られる散乱状態は次式で与えられる。

$$|k, \sigma\rangle^\pm = a_{k\sigma}^* |B\rangle + (E_B + \xi_k - H \pm i\delta)^{-1} [H', a_{k\sigma}^*] |B\rangle \quad (2.1)$$

但し、 $k > k_F$ (Fermi 波数) である。 ξ_k は Fermi energy を原点ととった band energy である。 H は全ハミルトニアン、 H' は電子と局在スピンの相互作用ハミルトニアンである。その相互作用は $|J| \mathbf{s} \cdot \mathbf{S}$ ととる。 \mathbf{s} は電子スピン、 \mathbf{S} は局在スピン。以下、全て $S = \frac{1}{2}$ の時のみ考える。 δ は正の微量である。

$k > k_F$, $k' > k_F$ の時、T-matrix は

$$\begin{aligned} T_{k'\sigma', k\sigma} &= \langle B | \frac{|J|}{N} \mathbf{S} \cdot (\mathbf{s})_{\sigma'\sigma} | B \rangle \\ &+ \langle B | j_{k\sigma} \frac{1}{H - E_B + \xi_k} j_{k'\sigma'}^+ | B \rangle + \langle B | j_{k'\sigma'}^+ \frac{1}{E_B + \xi_{k'} - H + i\delta} j_{k\sigma} | B \rangle \end{aligned} \quad (2.2)$$

但し $j_{k\sigma} \equiv [H', a_{k\sigma}^*]$, $j_{k'\sigma'}^+ \equiv [a_{k'\sigma'}, H']$ 。

$\langle B | \mathbf{S} | B \rangle = 0$ の故、(2.2) の右辺第一項は落ちる。

$|B\rangle$ を電子 $(2N+1)$ けの状態とする。(2.2) の右辺第二、第三項の中間状態には、 $j|B\rangle$ では $(2N+2)$ の状態、 $j^+|B\rangle$ には $2N$ の状態を許す。例えば、 $(2N+2)$ の状態として $\frac{\pm i\delta}{E_B + \xi_k - H \pm i\delta} a_{k\sigma}^+ |B\rangle$ ($k > k_F$)、 $(2N)$ の状態としては $\frac{\pm i\delta}{E_B + \xi_{k'} - H \pm i\delta} a_{k'\sigma'} |B\rangle$ ($k' < k_F$) の散乱状態が許される。しかし、このような散乱状態で表わされ得ない中間状態が $(2N)$ けの状態に生ずる。 $2N$ 体系の非摂動系を $\alpha_r^* |\varphi_0\rangle$ と表わす。 $|\varphi_0\rangle$ は、電子が Fermi 面迄充滿し、spinon の真空とする。 α_r^* は、 r 状態の spinon の生成演算子とする。これに相互作用を断熱的に入れた normal ground state を $|\Psi_r\rangle$ とする。この $|\Psi_r\rangle$ は散乱状態で表わされない。

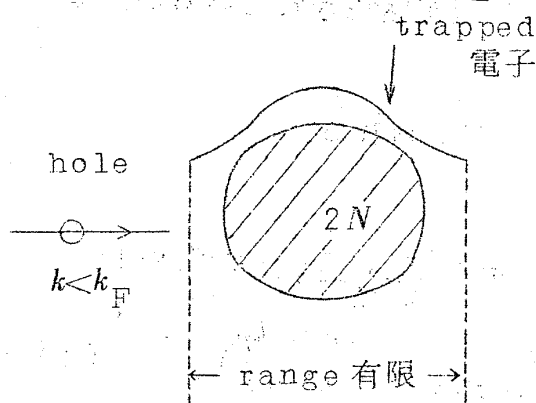


Fig (1)

Fig.1 に, $(2N)$ けの散乱状態を図式的に書いた。

このような状態は, $2N$ けの normal ground state を企んでいない。 $|\Psi_r\rangle$ なる状態は, target state としてのみ意味を有し, 散乱状態にはならない。即ち, (2.2) の右辺第二項に, 中間状態を入れた時生ずる

$$\sum_r \langle B | j_{k\sigma} | \Psi_r \rangle \frac{1}{E_g - E_B + \xi_k} \langle \Psi_r | j_{k'\sigma'}^+ | B \rangle \quad (2.3)$$

なる項を特別扱いすべきである。 E_g は, normal ground state の energy である。

$$0 = \langle B | (E_B - H) a_{k\sigma}^+ | \Psi_r \rangle = \langle \Psi_r | a_{k\sigma} (E_B - H) | B \rangle$$

より,

$$\langle B | j_{k\sigma} | \Psi_r \rangle = \langle B | a_{k\sigma}^+ | \Psi_r \rangle (E_B - E_g - \xi_k) \quad (2.4)$$

$$\langle \Psi_r | j_{k\sigma}^+ | B \rangle = \langle \Psi_r | a_{k\sigma} | B \rangle (E_B - E_g - \xi_k)$$

を得る。

$$\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle \equiv \Delta(\xi_k; \sigma r) / (\xi_k - (E_B - E_g)) \quad (2.5)$$

の記号を用いると, 次式を得る。

$$(2.3) = \sum_r \frac{\Delta^+(\xi_k, \sigma r) \Delta(\xi_k; \sigma' r)}{\xi_k - (E_B - E_g)} \quad (2.6)$$

但し, ここで物理的 T-matrix の定義 $\xi_k = \xi_{k'}$ を用いた。(2.2) の第二, 第三項の他の中間状態として, clew-low 近似の $|k, \sigma\rangle^{\pm}$ で表わさ

大阪之雄

れる状態のみをとる近似を採用する。(更の近似が黙認されているが、それについては、この節の最後に述べる。)

従って、Physical T-matrix は次式で与えられる。

$$T_{k'\sigma',k\sigma} = V_{\sigma\sigma'}(\xi_k) + \sum_{k''\sigma''} (T_{k''\sigma'',k'\sigma'})^* \frac{1}{\xi_k - \xi_{k''} + i\delta} T_{k''\sigma'',k\sigma} + \sum_{k''\sigma''} (\tilde{T}_{k''\sigma'',k'\sigma'})^* \frac{1}{\xi_{k'} + \xi_{k''}} \tilde{T}_{k''\sigma'',k\sigma} \quad \left(\begin{array}{l} k > k_F \\ k' > k_F \end{array} \right) \quad (2.7)$$

ここに、
$$V_{\sigma\sigma'}(\xi_k) = \sum_r \frac{\Delta^+(\xi_k, \sigma r) \Delta(\xi_k \sigma' r)}{\xi_k - (E_B - E_g)}$$

もしも、

$$\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle \doteq \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle \quad (2.8)$$

ならば、

$$\frac{\Delta(\xi_k; \sigma r)}{\xi_k - (E_B - E_g)} = \pm \Gamma(\xi_k) \quad \left(\begin{array}{l} \sigma r \\ \uparrow \downarrow \end{array} \text{の時} \right) \quad (2.9)$$

である。ここに $\Gamma(\xi_k)$ は、Yosida 理論で慣用の bound state 中の Amplitude を表わす量である。

(2.8) の近似の吟味は、後で述べる。

Yoshimori - Yosida によれば、

$$\Gamma(\xi_k) = \frac{\sqrt{C}}{[\xi_k - (E_B - E_g)] (1 + \rho_1 |J| \log \frac{\xi_k - (E_B - E_g)}{D})^{\frac{1}{4}}} \quad (2.10)$$

である。($\rho_1 = \frac{\rho}{N}$; ρ ; state density. $2D$; band 巾)

C は normalization constant である。most-divergence の近似では C^{-1} は発散するが、Yoshimori - Yosida の論文では疑わしいとしている形、

$$C^{-1} = \left(\frac{\rho}{-(E_B - E_g)} \right) \frac{1}{(\rho_1 |J|)^{\frac{1}{2}} \delta} \quad (2.11)$$

を採用する。即ち next-divergence を考慮しても、(2.11) の形に、規格常数が求まるものと仮定する。 δ は numerical constant (前に用いた正の微少量と混同しない事) で、この値はこの節の議論には効かない。(2.11) のようにとると、T-matrix は後述のように我々の近似が正しい energy 変数が小の所で、unitarity を充し、合理的である。

これ筆を用いると、

$$V_{\sigma'\sigma}(\xi_k) = \delta_{\sigma',\sigma} \left(\frac{\delta}{\rho} \right) (\rho_1 | J |) \frac{1}{\left(\frac{-\tilde{E}_B}{\xi_k - \tilde{E}_B} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \rho_1 | J | \ell_0 g \frac{\xi_k - \tilde{E}_B}{D} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.12)$$

但し $\xi_k > 0$ であり、 $\tilde{E}_B \equiv E_B - E_g$.

(2.7) と (2.12) で与えられた T-matrix の式を、 ξ_k を複素変数として、通常のように、解析接続をする。この時、問題は、 $V_{\sigma'\sigma}(\xi_k)$ の解析接続である。Yosida 理論では、 $\xi_k > 0$ でのみ上記の値が与えられている。そこで ξ_k を変数 ω に直して、任意の ω に対して、

$$V_{\sigma'\sigma}(\omega) = \delta_{\sigma',\sigma} \left(\frac{\delta}{\rho} \right) (\rho_1 | J |) \frac{1}{\left(\frac{-\tilde{E}_B}{|\omega| - \tilde{E}_B} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \rho_1 | J | \ell_0 g \frac{|\omega| - \tilde{E}_B}{D} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2.13)$$

と拡張する。

(2.13) の意味を、我々は次のように考える。Yosida 理論では、Fermi 面に電子 trap の singlet ground state $|B\rangle$ 即ち $\langle B | \alpha_{k\sigma}^* \alpha_r^* | \varphi_0 \rangle \neq 0$ ($k > k_F$) なる state $|B\rangle$ を考えた。しかし既に指摘されている様に、hole trapp の singlet bound state $|B'\rangle$ 即ち $\langle B' | \alpha_{k\sigma} \alpha_r^* | \varphi_0 \rangle \neq 0$ なる状態 $|B'\rangle$ も ($k < k_F$) 同様に存在する。

Appendix II で、この $|B'\rangle$ に対する議論を行った。近似が低い段階では、確かに、

$$\sum_{k\sigma, r} \equiv \langle B' | \alpha_{k\sigma} \alpha_r^* | \varphi_0 \rangle \quad (k < k_F)$$

大阪之雄

で定義される Δ が, (2.8) の $\Gamma_{k\sigma, r} \equiv \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$ ($k > k_F$) と或る関係を有し, $V_{\sigma'\sigma}(\omega)$ を (2.13) のように考えても良い事が示される。即ち, 我々は, 今迄 $|B\rangle$ 状態のみ考えて来たが, $|B'\rangle$ 状態も同様に存在し, ground state は $\frac{1}{2}(|B\rangle + |B'\rangle)$ の形になっていると考えるのである。故に, (2.13) は単なる解析接続でなく, 系の基底状態に対して, 上記のような重大な仮定を導入した事に相当する。

(2.8) の仮定を吟味しよう。これは, Appendix I でなされてるが, それを要約すれば, 次のようになる。(2.8) は, most divergence の近似で成立つと結論される。しかし, ここでの most divergence という意味は, 次のようなものである。 $(\xi_k - \tilde{E}_B) \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$ 即ち $\Gamma(\xi_k)(\xi_k - \tilde{E}_B)$ を $|J|$ で展開すると,

$$\Gamma(\xi_k)(\xi_k - \tilde{E}_B) = 1 - \frac{1}{4} \rho_1 |J| \log \frac{\xi_k - \tilde{E}_B}{D} + \frac{3}{32} (\rho_1 |J|)^2 \times \left(\log \frac{\xi_k - \tilde{E}_B}{D} \right)^2 + \dots$$

である。この $|J|$ の各係数は, $\xi_k - \tilde{E}_B \rightarrow 0$ とすると, 発散する。この事を most divergence と考える。Appendix I に於て, $(\xi_k - \tilde{E}_B) \langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle - (\xi_k - \tilde{E}_B) \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$ なる量を $|J|$ で展開すると, 各 $|J|$ の係数は $(\xi_k - \tilde{E}_B) \rightarrow 0$ で Zero になる事が示される。即ち,

$$(\xi_k - \tilde{E}_B) [\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle - \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle] \simeq \rho_1 |J| [(\xi_k - \tilde{E}_B) \eta \text{ or } (\xi_k - \tilde{E}_B) \log (\xi_k - \tilde{E}_B)] + \dots$$

である事が予測される。 $0 < \eta < 1$.

この意味で, (2.8) は正しい。

以上の仮定の下に, T-matrix 中の消えない non spin flip 部分 $t(z)$ は次式を充す。

$$\left. \begin{aligned} t(z) &= V(z) + \rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D |t(x+i\epsilon)|^2}{z-x} dx \\ V(z) &= \left(\frac{\delta}{\rho} \right) (\rho_1 |J|)^2 \left(\frac{1}{|z| - \tilde{E}_B} \right) \frac{1}{(1 + \rho_1 |J| \log \frac{|z| - \tilde{E}_B}{1})^2} \end{aligned} \right\} (2.14)$$

この解は次のようにして求まる。

$$\left[\begin{aligned} \bar{t}_{k'k}(\xi_k) &= g_k g_{k'} + \int \frac{\bar{t}_{kq}(\xi_q) t_{k'q}^*(\xi_q)}{\xi_k - \xi_q + i\delta} d^3q \quad (2.14)' \\ g_k &\equiv \left(\frac{\delta}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} (\rho_1 |J|)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{-\tilde{E}_B}{|\xi_k| - \tilde{E}_B} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(1 + \rho_1 |J| \ell \log \frac{|\xi_k| - \tilde{E}_B}{D})} \end{aligned} \right.$$

なる方程式を考える。この解の S wave 部分 $t_s(\xi_k)$ を求め、この $\xi_k \rightarrow \omega$ と解析接続すれば (2.14) の解が得られる。(2.14)' は, separable Potential を有する Impurity problem と同等で、次の様にとける。

$$\bar{t}_{k'k}(\xi_k) = \frac{g_k g_{k'}}{1 - \sum_{\ell} \frac{g_{\ell}^2}{\xi_k - \xi_{\ell}}}$$

これより,

$$t(z) = \frac{V(z)}{1 + \rho \int_{-D}^D \frac{V(z')}{z' - z} dz'} \quad (2.15)$$

$$z \rightarrow 0 \text{ の場合, } V(z) \rightarrow \frac{\delta}{\rho} \frac{1}{\left| \frac{z}{-\tilde{E}_B} \right|^{\frac{1}{2}}}$$

$$\text{の事を用いると, } \lim_{x \rightarrow 0} P \int_{-D}^D \frac{\rho V(x')}{x' - x} dx' \rightarrow \frac{-\delta \Pi}{\sqrt{\left(\frac{x}{-\tilde{E}_B} \right)}} \quad (P; \text{主値})$$

を見出す。故に、次式を得る。

$$\lim_{x \rightarrow 0} t(x+i\varepsilon) = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{\delta \sqrt{-\tilde{E}_B}}{\rho \sqrt{x}}}{1 - \delta \pi \sqrt{\frac{-\tilde{E}_B}{x}} + i \pi \delta \frac{\sqrt{-\tilde{E}_B}}{x}} = \frac{1}{\rho \pi} \frac{1}{(-1+i)} \quad (2.16)$$

(2.16) は (2.15) より生ずる $\text{Im} \frac{1}{t(x+i\epsilon)} = \pi\rho$ の unitary 性を $x \simeq 0$ で充している。また,

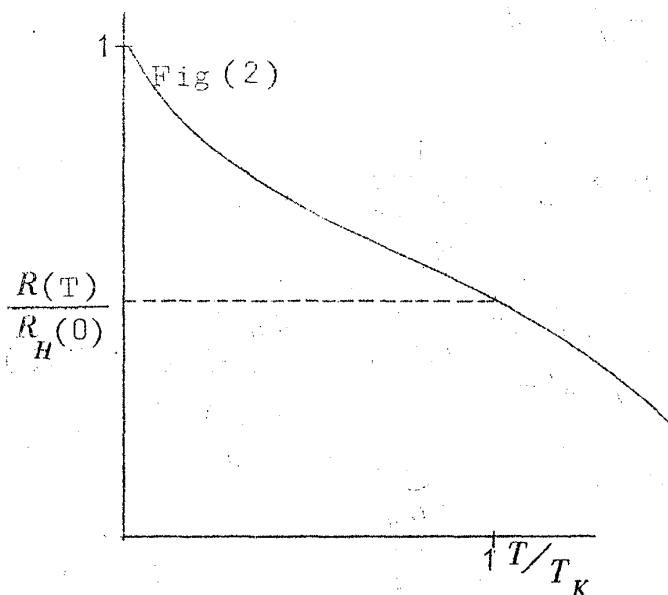
$$\lim_{x \rightarrow 0} \text{Im} t(x+i\epsilon) = -\frac{1}{2\pi\rho} \quad (2.17)$$

電気抵抗 R に対して, $R = \frac{2\pi}{ne^2 k_F} \frac{\pi\rho}{\tau(0)}$, $(\tau(\epsilon))^{-1} = -2c \text{Im} t(\epsilon)$

(c ; Impurity 濃度) の近似で求めると, 0°K の電気抵抗は, Hamann¹⁾ または Suhl 理論⁵⁾ によるものの半分の値になっている。それ等では $\lim_{x \rightarrow 0} \text{Im} t(x+i\epsilon) = -\frac{1}{\pi\rho}$ である。従って, Fig 2 の様に, Hamann の値と, 現在の値は, 差を有する。長岡の理論 (Suhl の理論も同様) では,

$$\lim_{x \rightarrow 0} t(x+i\epsilon) = \frac{-\frac{E_B}{x}}{\pi\rho(1+i\frac{-E_B}{x})}$$

の形で, 解析的に可成の差が認められる。



$R_H(0)$ は Hamann の 0°K の値。

0 ; 現在の値。…… は推測の温度変化。

最後に, (2.7) の近似

について述べる。実際は,

Chew - Low 近似に限っ

ても, 中間状態に (2.1)

の $|k, \sigma>^{\pm}$ を取るだけで

は不十分である。例えば,

Zero 近似で

$$a_{k\sigma}^* (a_{k'\uparrow}^* a_{\uparrow}^*) | \varphi_0 >$$

になるような, 即ち電子

と局在スピンの triplet

に結合しているような状態

迄考えないと完全系をつく

らない。このような状態は,

基底状態の上, 大体 $|\tilde{E}_B|$

位の所から始ると思われる。このような状態は、記号的に、 $t(z)$ に対して

$$\left[\rho \int_{|\tilde{E}_B|}^D \frac{|F(x)|^2}{z-x} dx + \rho \int_{-D}^{-|\tilde{E}_B|} \frac{|G(x)|^2}{z-x} dx \right] \text{ のような寄与を与える。}$$

しかし、(2.16) の $\lim_{x \rightarrow 0} t(x+i\epsilon)$ の形は、essential に、 $t(z)=V(z)$

$$+ \rho \int_{-|\tilde{E}_B|}^{|\tilde{E}_B|} \frac{|t(x)|^2}{z-x} dx \text{ の式で生ずる故、} \lim_{x \rightarrow 0} t(x+i\epsilon) \text{ の形は、} |\tilde{E}_B|$$

以下の excitation energy を有する固有状態で定められている。この範囲の状態は、十分良く $|k, \sigma\rangle^+$ で表わされると思われる。即ち、(2.14) は、real z

に対して $|z| \leq |E_B|$ の範囲のみ、正しいと考うべきである。故に、 $x \simeq 0$ 附近での $t(x)$ でのみ定まる物理量についてしか、ここでの扱いは議論出来ない。電気抵抗はそのような量である。帯磁率についても、そのような表現が望まれる。 $|x| \gtrsim |\tilde{E}_B|$ で $t(x)$ の定性的模様は次のようなものと思われる。

$|x| \gtrsim |\tilde{E}_B|$ では inelastic threshold (inelastic spin flip Process の出現) が生じ、 $1-2\pi i \rho t(x) = e^{2i\delta(x)}$ の phase shift $\delta(x)$ は real である事が許されなくなる。

§ 3. 任意の温度における T-matrix 方程式

⁸⁾ Nakajima は、次のようなグリーン函数を考えた。

$$\left. \begin{aligned} G(k\alpha t; k'\alpha' t') &= \langle \Phi | T a_{k\alpha}(t) a_{k'\alpha'}^*(t') | \Phi \rangle \\ F(\beta t; k'\alpha' t') &= \langle \Phi | T a_{\beta}^*(t) a_{k'\alpha'}^*(t') | \Phi \rangle \end{aligned} \right\} \quad (3.1)$$

ここに、

$$A(t) \equiv e^{i\tilde{\mathcal{H}}t} A e^{-i\tilde{\mathcal{H}}t} \quad (\hbar=1),$$

$$\tilde{\mathcal{H}} = H - (\tilde{E}_B) \sum_r \alpha_r^* \alpha_r$$

$$|\Phi\rangle = \eta |\Phi_0\rangle + \sqrt{1-\eta^2} |\Phi_1\rangle, \quad \left(\begin{array}{l} |\Phi_0\rangle; \text{ spinon 無し, 電子 } N \text{ 個} \\ |\Phi_1\rangle; \text{ spinon 1 個, 電子 } (N+1) \text{ 個} \end{array} \right)$$

大阪之雄

且、状態は、スピノンが0個と1個の Sub space に限る。

上の G, F に対して anomalous part のみ考えて次式を得た。

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_k) G(k\alpha; k'\alpha'; \omega) &= \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'} + \sum_{\beta} \Delta(\alpha\beta; \omega) F(\beta, k\alpha'; \omega) \\ (\omega - \tilde{E}_B) F(\beta; k'\alpha'; \omega) &= \sum_{k\alpha} \Delta^+(\beta\alpha; \omega) G(k\alpha; k'\alpha'; \omega) \end{aligned} \quad (3.2)$$

$\frac{\Delta^+(\beta\alpha; \omega)}{\omega - \tilde{E}_B}$ が、Yosida 理論の $\Gamma(\omega)$ に対応する事を、Nakajima は、示した。(3.2) より、 F を消去すると、次式を得る。

$$\begin{aligned} (\omega - \xi_k) G(k\alpha; k'\alpha'; \omega) &= \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'} + \sum_{\beta k''\alpha''} \Delta(\alpha\beta; \omega) \frac{1}{\omega - \tilde{E}_B} \\ &\times \Delta^+(\beta\alpha''; \omega) G(k''\alpha''; k'\alpha'; \omega) \end{aligned} \quad (3.3)$$

これを、 G への anomalous part の寄与と考えると、(3.3) は正しく、(2.13) で与えられる既約の self-energy 即ちポテンシャルが、bound state の形式により生ずる事を表わしている。 G は、 $\eta \rightarrow 0$, $\tilde{E}_B \rightarrow 0$ では、通常の normal グリーン函数である。この事を飛躍させて、次のように仮定する。bound state の形式は、T-matrix 中の non spin flip term に、spin independent potential $V(\omega)$ を与える事によって、とりこまれ得ると仮定する。即ち、 $T > T_k$ で、non spin flip 項 $t(z)$ に対して、 $t(z) = H(t, T)$ の形の式が成立つ時は、 $T < T_k$ では、

$t(z) = V(z) + H(t, T)$ の式が成立つとする。更に、 $T > T_k$ では、

$H(t, T)$ の functional form (例えば二時間グリーン函数の decoupling の結果の式) は、Suhl の散乱理論より、次のようにして求め得るとする。そこに表われる spin flip 項 $\tau(z)$ を用いて、Suhl の理論では、 $t(z) = f(\tau, t)$, $\tau(z) = g(\tau, t)$ の形である。第二式より形式的に $\tau = h(t)$ とし、第一式に代入した $t(z) = f(h(t), t)$ の式に表われる $f(h(t), t)$ を $H(t, T)$ にとる。従って、 $T < T_k$ では、量 $\tau(z)$ を全く数学的補助量と考えて、次のような式が成立つと仮定する。

$$(3.4) \quad \begin{cases} t(z) = V(z) + \rho \int_{-D}^D \frac{|t(z)|^2 + 4S(S+1)|\tau(x)|^2}{z-x} dx, \\ \tau(z) = \frac{|J|}{4N} + \rho \int_{-D}^D \frac{\tau(x)t^*(x) + \tau^*(x)t(x) - 2|\tau(x)|^2 \tanh \frac{1}{2}\beta x}{z-x} dx \\ V(z) = \frac{\delta}{\rho} (\rho_1 |J|)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{-\tilde{E}_B(T)}{|z| - \tilde{E}_B(T)} \right) \frac{1}{\left[1 + \rho_1 |J| \log \frac{|z| - \tilde{E}_B(T)}{D} \right]^{\frac{1}{2}}} \end{cases}$$

但し、上式は $S = \frac{1}{2}$ の時のみ意味を有する。 $|\tilde{E}_B(T)|$ は、

$$1 = |J| \rho_1 \int_0^D \frac{\xi d\xi}{\xi^2 + (\tilde{E}_B(T))^2} \tanh \frac{1}{2} \beta \xi \quad (3.5)$$

で定まるとする。 $\beta = \frac{1}{T}$ (以下 Boltzmann 常数を 1 とする)

(3.4) (3.5) が、有限温度の T matrix に対する方程式の提案である。

以下、(3.4) の解を求める事を考える。 $(x+i\epsilon)$ を単に x と書く)

$$t_v(z) = -\frac{1}{2\pi i \rho} [e^{2i\delta_v(z)} - 1] \quad (3.6)$$

で与えられる real phase shift $\delta_v(z)$ を考える。(2.15) より、次式を得る。

$$\left. \begin{aligned} \delta_v(x) &= \frac{1}{2i} \log \frac{F_-(x)}{F_+(x)}, \\ F_{\pm}(x) &= 1 + \rho \int_{-D}^D \frac{dx' V(x')}{x' - (x \pm i\delta)} \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

$$t(z) = -\frac{1}{2\pi i \rho} [e^{2i\delta(z)} - 1] \quad (3.8)$$

で定義される complex phase shift $\delta(z)$ を用いる。

$\delta(x) = \delta'(x) + i\delta''(x)$ とする。

Kramers - Kronig 関係より、次式を得る。

$$\delta''(x) = -\frac{P}{\pi} \int \frac{[\delta'(x') - \delta_v(x')]}{x' - x} dx'$$

$$1/\tau(z) = \exp\left(-\frac{2}{\pi} \int \frac{\delta'(x)}{x-z} dx\right) u(z) \quad \text{と置くと,}$$

$$u^+(x) - u^-(x) = -4\pi i \rho \tanh \frac{\beta x}{2} \exp \left\{ 2\delta''(x) + \frac{2}{\pi} \int \frac{dx' \delta'(x')}{x' - x} \right\}, \quad (3.9)$$

を得る。(3.7) より, contour 積分で次式を得る。

$$\left| \frac{t_v(z)}{V(z)} \right| = \exp \left(\frac{1}{\pi} P \int \frac{dx' \delta_v(x')}{x' - x} dx' \right) \quad (3.10)$$

(3.9) の方程式で, D, C, C , Ambiguity を考えないと, 最後の結果として次式を得る。

$$\left. \begin{aligned} \delta''(x) &= \frac{1}{4} \log \left[1 + \frac{16\pi^2 \rho^2 S(S+1)}{|\tilde{X}(x)|^2} \right] \\ \tilde{X}(z) &= \frac{\left[\frac{4N}{|f|} - 2\rho \int_{-D}^D dx \left| \frac{t_v(x)}{V(x)} \right|^2 \frac{\tanh \frac{1}{2} \beta x}{x-z} \right]}{\left| \frac{t_v(x)}{V(x)} \right|^2} \\ S(z) &= 1 + 2\pi i \rho t(z) = e^{2i\delta(z)} \\ \delta(x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-D}^D \frac{\delta''(x') dx'}{x' - (x+i\eta)} + \delta_v(x), \\ \delta_v(x) &= 2 \tan^{-1} \frac{\pi \rho V(x)}{1 + \rho P \int_{-D}^D \frac{dx' V(x')}{x' - x}}, \\ \tau(z) &= \frac{S(z)}{\tilde{X}(z)} \end{aligned} \right\} \quad (3.11)$$

Suhl のやり方と同じであるが, Static Potential でない事を考えて, 要点を書いた。

§ 2 で述べたように, $x \rightarrow 0$ で $V(x) \rightarrow \infty$ $t_v(x) \rightarrow$ 有限の故

$\left| \frac{t_v(x)}{V(x)} \right| \rightarrow 0$ 即ち $\lim_{x \rightarrow 0} \tilde{X}(x) \rightarrow \infty$ で $\lim_{x \rightarrow 0} \tau(x) \rightarrow 0$ である。従って $x \simeq 0$ の模様は, (2.15) の結果と同様である。 $|x|$ が大きくなると差が生ずるが, しかしこの差は, § 2 の最後で述べたように, 意味が無い。

(3.11) の導出には, $\tau(z)$ が complex Pole を有しない事必要である。この complex pole が生じないための必要条件は次式で与えられる。

$$|J| \rho_1 \int_0^D \frac{dx}{x} \left| \frac{t_v(x)}{V(x)} \right|^2 \tanh \frac{\beta x}{2} \leq 1 \quad (3.12)$$

この条件は, normalization より生ずる数 factor δ に対して下限を必要とする。

§ 4. qualitative calculation

具体的に (3.4) (3.5) を仮定して, 一般の温度について解く事は止めて, 定性的模様を論ずるため, $t(z)$ に対して一応合理的な形を仮定して, 物理量の値を論じてみる。 $z \rightarrow \infty$ で $\left| \frac{t_v(z)}{V(z)} \right| \rightarrow 1$, $\lim_{z \rightarrow 0} t(z) = \lim_{z \rightarrow 0} t_v(z) = \frac{1}{2\pi\rho} (1+i)$

の事を用いて, 0°K で $t(x)$, $\tau(x)$ は以下の形をとるとする。

$$\left. \begin{aligned} t(x) - t_n(x) &= \begin{cases} -\frac{1}{2\pi\rho} (1+i) |x| < |\tilde{E}_B| \\ 0 & |x| > |\tilde{E}_B| \end{cases} \\ \tau(x) &= \begin{cases} 0 & |x| < |\tilde{E}_B| \\ \tau_n(x) & |x| > |\tilde{E}_B| \end{cases} \\ \left| \frac{t_v(x)}{V(x)} \right|^2 &= \begin{cases} 0 & |x| < |\tilde{E}_B| \\ 1 & |x| > |\tilde{E}_B| \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

上式で, $t_n(x)$, $\tau_n(x)$ とは $V(x)$ を考えない時の解で, 且, 温度に対する作爲的接続をしない値とする。例えば 0°K で

$$t_n(x) = \frac{(-i\pi\rho_1) 3J^2}{16N} \frac{1}{(1+|J|\rho_1 \log \frac{x}{D})}$$

のようなものとする。(4.1) は, お互に定性的な意味で, consistentで

大阪之雄

ある。(4.1)の第三式が成立てば、 0°K で(3.12)を充し complex pole は $\tau(z)$ に生じない。先づ、事情が consistent になっているかを調べるために、ground state energy を求めてみる。ground state に対する仮定なしに、

$$\langle H' \rangle = - \frac{1}{|J|} \lim_{\omega \rightarrow \infty} [\omega t(\omega)] + \frac{|J|S(S+1)}{2N} \int_{-D}^D \rho dx \quad (4.2)$$

が成立つ事を前に示した。

$$\tilde{X}(x) \equiv \frac{4N}{|J|} G(x) \quad \text{とおくと}$$

$$\langle H' \rangle = - \frac{\rho}{|J|} \int_{-D}^D |t(x)|^2 dx - \frac{|J|}{2N} \rho S(S+1) \int_{-D}^D$$

$$\times \left[\frac{1}{|G(x)|^2 + J^2 \rho_1^2 S(S+1) \pi^2} - 1 \right]$$

となる。(4.1)の t と $t_n(x)$, τ と τ_n の差より生ずる $\langle H' \rangle$ の寄与を $\langle H' \rangle_{ab}$ とする。

$$\langle H' \rangle_{ab,1} \doteq - \frac{2\rho}{|J|} \int_0^{\tilde{E}_B} |t(x=0)|^2 dx = - \frac{2|\tilde{E}_B|}{|J|\rho_1\pi^2}$$

$G(x) = 0$, $|x| \lesssim |\tilde{E}_B|$ とすると

$$\langle H' \rangle_{ab,2} \doteq \frac{-|\tilde{E}_B|}{|J|\rho_1\pi^2} \quad \langle E \rangle_{ab} = \int_0^1 \frac{\langle H' \rangle_{ab,g}}{g} dg$$

$$\doteq - \frac{3}{\pi} |\tilde{E}_B| \quad (\text{但し, } g \text{ は } |J| \text{ を } g|J| \text{ とした coupling parameter})$$

この結果は、consistent である。

以下、(4.1)を用いて、次のような speculation を行う。most divergence で摂動計算を行うと、物理量に $1 + \rho_1 |J| \log \frac{T}{D}$ なる量が表われる。

この量は、次のような Analogie で、我々の扱いは 0°K で $1 + \rho_1 |J| \log \frac{|\tilde{E}_B|}{D}$ になるものとする。

$$\begin{aligned}
 1 + \rho_1 |J| \log \frac{T}{D} &\rightarrow 1 - \frac{|J| \rho_1}{2} \int_{-D}^D dx \tanh \frac{\frac{\beta}{2} x}{x} \\
 &\xrightarrow{\text{(我々の扱い)}} 1 - \frac{|J| \rho_1}{2} \int_{-D}^D dx \left| \frac{t_v(x)}{V(x)} \right|^2 \frac{\tanh \frac{\beta}{2} x}{x} \\
 &\xrightarrow{(0^\circ\text{K})} 1 - |J| \rho_1 \int_{|\tilde{E}_B|}^D \frac{dx}{x} = 1 + |J| \rho_1 \log \frac{|\tilde{E}_B|}{D}
 \end{aligned}$$

高温と低温をつなぐ内挿として、摂動計算に表われる $\log \frac{T}{D}$ は一般の高温で $\log \frac{T + |\tilde{E}_B(T)|}{D}$ なる量で置きかえられるべきとする。

例えば、摂動計算の抵抗 R (R_0 は Born 近似の値) は、次式で与えられる。

$$R/R_0 = \left[\left(1 + \rho_1 |J| \log \frac{T}{D} \right)^2 + \frac{3}{16} (\rho_1 |J| \pi)^2 \right]^{-1}$$

これが正しくは、

$$R/R_0 = \left[\left(1 + \rho_1 |J| \log \frac{T + |\tilde{E}_B(T)|}{D} \right)^2 + \frac{3}{16} (\rho_1 |J| \pi)^2 \right]^{-1} \quad (4.3)$$

となるとする。

この事は、 $\frac{1}{\tau(0)} = \frac{\pi}{\rho} \frac{3}{16} (\rho_1 |J| \pi)^2 \times$

$$\times \left[\left(1 + \rho_1 |J| \log \frac{T + |\tilde{E}_B(T)|}{D} \right)^2 + \frac{3}{16} (\rho_1 |J| \pi)^2 \right]^{-1}$$

に相当し、 0°K で $\frac{1}{\tau(0)} \rightarrow \frac{\pi}{\rho}$ 即ち $\text{Im } t(0) = -\frac{\pi}{2\rho}$ に相当し、§2の

と一致する。同様に、帯磁率に対する摂動計算の式 (例えば Hamann の結果) ,

$$\chi/\chi_0 = 1 - \frac{\rho_1 |J|}{(1 + \rho_1 |J| \log \frac{T}{D}) + \rho_1 |J| \log 2}$$

を, (ここに $\chi_0 = \frac{g^2 \mu_B^2 S(S+1)}{T}$, g : g factor, μ_B Bohr Magnetron)

$$\chi/\chi_0 = 1 - \frac{\rho_1 |J|}{(1 + \rho_1 |J| \log \frac{|\tilde{E}_B(T)| + T}{D}) + \rho_1 |J|} \quad (4.4)$$

と訂正すべきと考える。Next divergence の $\rho_1 |J|$ の係数は, $T=0$ で $\chi/\chi_0 = 0$ のようにとった。偶然であろうが, (4.4) で $T \rightarrow 0$ とすると

$$\chi = \frac{1}{|\tilde{E}_B|} \frac{g^2 \mu_B^2}{4} \quad \text{となり, Yosida 理論の Ishii の結果と一致} \quad 9)$$

する。

(4.3) (4.4) は, 内挿としての提案である。これは Appendix III で粗い近似で出している。(4.3) (4.4) に基づいた数値計算の結果を, Fig 3 に示している。 (χ/χ_Y) なる記号の χ_Y は, Yosida 理論の 0°K での値である。

§ 5. Discussion

この小論で, 曲りなりに正当化がなされている議論は, § 2 のものだけである。§ 3, § 4 は, 綱渡りの speculation に充ちて

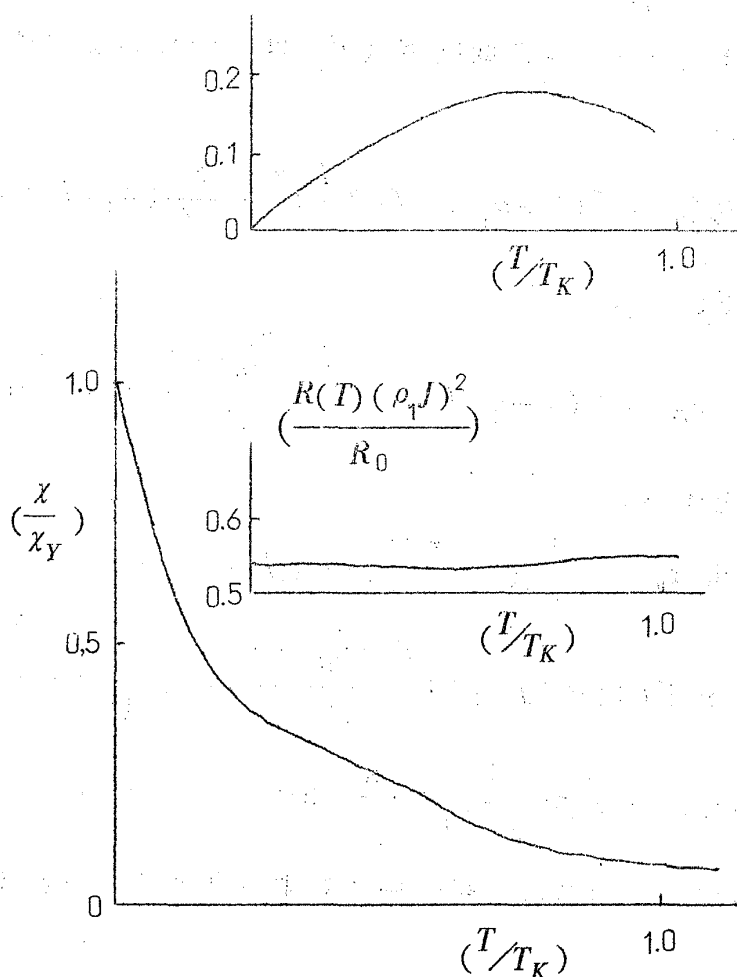


Fig 3

いる。要するに、Nakajima の異常グリーン函数の方法に、normal part を含めるという問題を、speculation になぞってみた形になっている。

§ 2 の計算が正しければ、二時間グリーン函数（または Suhl の理論）の結果は、Yosida 理論につながらないと思われる。二時間グリーン函数の扱いでも、或る種の spin independent potential が生じている事を前に指摘した。しかし、§ 2 に述べたように、その場合の potential $V'(x)$ は $x \rightarrow 0$ で $V'(x) \propto \frac{1}{x}$ 、現在のものは $x \rightarrow 0$ で $V(x) \propto \frac{1}{|x|^{\frac{1}{2}}}$ で、解析的模様が異っている。

通常、二時グリーン函数の $t(x)$ に対する °K の結果が、 $x \rightarrow 0$ で unitarity を充す (unitarity limit) 事が、状態が singlet になっている事と同等と考えている。しかし、この議論は、「singlet ならば、unitary limit である」という正しい命題の逆も正しいと考えているので、果して良いか判らない。

(Appendix I) $\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle \doteq \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$ の事。

この Appendix の議論及び Appendix II の議論に必要な $\Gamma_{k\sigma;r} \equiv \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$ ($k > k_F$) に対する方程式 (Yosida 及び Okiji のものと同一) を、導いておく。以下 $a_{\underline{k}\sigma}^*$ の意味は、($k > k_F$) を、 $a_{\underline{k}\sigma}$ のそれは ($k < k_F$) を表し、和がある時は、この条件の下に行うべきとする。

$$\begin{aligned} 0 &= \langle B | (E_B - H) a_{\underline{k}\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle \\ &= \langle B | (E_B - \xi_k) a_{\underline{k}\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle - \langle B | [H', a_{\underline{k}\sigma}^* a_r^*] | \varphi_0 \rangle, \end{aligned}$$

より、次式を得る。

$$\begin{aligned} (E_B - \xi_k) \Gamma_{\underline{k}\sigma;r} &= \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{k'\beta\sigma'} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma'\sigma}) \Gamma_{\underline{k}'\sigma';\beta} \\ &+ \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{k'k''\alpha'\alpha''\beta} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha'}) \Gamma_{\underline{k}\sigma k'\alpha', k''\alpha'';\beta}, \end{aligned} \quad (\text{A.1.1})$$

$$\Gamma_{k\sigma, k'\alpha', k''\alpha'';\beta} \equiv \langle B | a_{k\sigma}^* a_{k'\alpha'}^* a_{k''\alpha''}^* a_\beta^* | \varphi_0 \rangle \quad (\text{A.1.1})'$$

$$\langle B | (E_B - H) a_{k\sigma}^* a_{k'\alpha'}^* a_{k''\alpha''}^* a_{\beta}^* | \varphi_0 \rangle = 0 \text{ より,}$$

次式を得る。

$$\begin{aligned} & \Gamma_{\sqrt{1}\sigma_1, \sqrt{2}\sigma_2, \sqrt{3}\sigma_3; r} (E_B - \xi_{k_1} - \xi_{k_2} + \xi_{k_3}) = \\ & \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{\beta} \{ (-) (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma_3\sigma_1}) \Gamma_{\sqrt{2}\sigma_2; \beta} + (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma_3\sigma_2}) \Gamma_{\sqrt{1}\sigma_1; \beta} \} \\ & + \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{k\alpha\beta} [(\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\sigma_1}) \Gamma_{\sqrt{1}\sigma_1, \sqrt{2}\sigma_2, \sqrt{3}\sigma_3; \beta} + \\ & + (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\sigma_2}) \Gamma_{\sqrt{1}\sigma_1, \sqrt{2}\sigma_2, \sqrt{3}\sigma_3; \beta} - (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\sigma_3}) \Gamma_{\sqrt{1}\sigma_1, \sqrt{2}\sigma_2, \sqrt{3}\sigma_3; \beta}] \\ & + \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{kk'\alpha\alpha'\beta} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha'}) \langle B | a_{\sqrt{1}\sigma_1}^* a_{\sqrt{2}\sigma_2}^* a_{\sqrt{3}\sigma_3}^* a_{k\sigma}^* a_{k'\alpha'}^* a_{k''\alpha''}^* a_{\beta}^* | \varphi_0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A. 1.2})$$

これ等は, Yosida 及び Okiji のものと同一である。

$$\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle = \langle B | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$$

$$\equiv \langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle' \text{ とすると}$$

$$| \Psi_r \rangle' = C \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{(1-P)}{E_g - H_0} H' \right)^n a_r^* | \varphi_0 \rangle \right\} \quad (\text{A. 1.3})$$

$$\equiv C \sum_{n=1}^{\infty} | \Psi_r \rangle^n \quad (P; \text{慣用の projection operator})$$

である。C は規格常数である。C は高次迄 Sum すれば有限の故, ここでは本質的役割を果さず, 以下 $C=1$ と置く。

$$\begin{aligned} \langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle' &= \left(\frac{J}{2N} \right) \sum_{k'\alpha', k''\alpha''} \Gamma_{\sqrt{1}\sigma, k'\alpha', k''\alpha''; \beta} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha'\alpha''}) \times \\ &\times \frac{1}{(\xi_{k'} - \xi_{k''} - E_g)}. \quad \text{所で (A. 1.2) より} \end{aligned}$$

$$\Gamma_{k\sigma, k'\alpha', k''\alpha''; \beta} = \frac{F(k\sigma, k'\alpha', k''\alpha''; \beta)}{\xi_{k'} - \xi_{k''} + \xi_k - E_B} \quad \text{と書けるので,}$$

次式を得る。

$$\begin{aligned}
\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle & (\xi_k - \tilde{E}_B) \\
&= \left(\frac{J}{2N} \right) \sum_{\substack{k'k''\beta \\ \alpha'\alpha''}} \left(\frac{1}{\xi_{k'} - \xi_{k''} - E_g} - \frac{1}{\xi_{k'} - \xi_{k''} + (\xi_k - E_B)} \right) (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha'\alpha''}) \\
&\quad \times F(\sqrt{k\sigma}, \sqrt{k'\alpha'} \sqrt{k''\alpha''}; \beta)
\end{aligned}$$

この右辺は、 F が $\xi_k \rightarrow \tilde{E}_B$ で有限ならば、 $\xi_k - \tilde{E}_B = \xi_k - (E_B - E_g)$
 $= 0$ とすると消える。同様に、

$$\begin{aligned}
\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle^2 & (\xi_k - \tilde{E}_B) \\
&= \left(\frac{J}{2N} \right)^2 \sum_{\substack{k'k''\alpha'\alpha''\beta \\ k_1k_2\alpha_1\alpha_2\beta_1}} (\vec{S}_{\beta_1\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha_1\alpha_2}) (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha'\alpha''}) \left(\frac{1}{\xi_{k_1} - \xi_{k_2} + \xi_{k'} - \xi_{k''} - E_g} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\xi_{k_1} - \xi_{k_2} + \xi_{k'} - \xi_{k''} + \xi_k - E_B} \right) \frac{G(k\sigma, k_1\alpha_1, k_2\alpha_2, k'\alpha', k''\alpha''; \beta)}{\xi_{k'} - \xi_{k''} - E_g},
\end{aligned}$$

$$\text{ここに } \langle B | a_{k\sigma}^* a_{k_1\alpha_1}^* a_{k_2\alpha_2}^* a_{k'\alpha'}^* a_{k''\alpha''}^* a_{\beta}^* | \varphi_0 \rangle$$

$$\equiv G(k\sigma, k_1\alpha_1, k_2\alpha_2, k'\alpha', k''\alpha''; \beta) (\xi_k - E_B + \xi_{k_1} - \xi_{k_2} + \xi_{k'} - \xi_{k''})^{-1}$$

この右辺も $\xi_k - \tilde{E}_B \rightarrow 0$ で消える。

具体的に、

$$\langle B | a_{k\sigma}^* | \Psi_r \rangle^1 (\xi_k - \tilde{E}_B) = - \frac{3}{16} (\rho_1 |J|)^2 \int_0^D \frac{d\epsilon' \Gamma(\epsilon') \log \left(\frac{\xi_k + \epsilon' - \tilde{E}_B}{\epsilon'} \right)}{(1 + \rho_1 |J| \log \frac{\xi_k + \epsilon' - \tilde{E}_B}{\epsilon'})}$$

で、これは $(\xi_k - \tilde{E}_B) = 0$ で消えるが、 $(\xi_k - \tilde{E}_B)$ の power series 展開は不可能の故、order として $\rho_1 |J| (\xi_k - \tilde{E}_B)^\eta$ ($0 < \eta < 1$) か $\rho_1 |J| (\xi_k - \tilde{E}_B) \log (\xi_k - \tilde{E}_B)$ であろう。

(Appendix II)

hole trapped state を $|B'\rangle$ とする。この energy を E_B' とする。

$\sum_{k\sigma;r} \equiv \langle B' | a_{k\sigma}^* a_r^* | \varphi_0 \rangle$ に対する式を導く。

(A. 1.1) (A. 1.2) に対応する結果を書けば、次の様になる。以下 $\vec{\sigma}$ は $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を表わしていたのに対して $\vec{\sigma}^*$ は $(\sigma_x, -\sigma_y, \sigma_z)$ を表わすとする。

$$(E_{B'} + \xi_k) \sum_{\underline{k}\sigma, r} = \left(\frac{J}{2N}\right) \sum_{\underline{k}'\beta\sigma'} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma'\sigma}^*) \sum_{\underline{k}'\sigma'; \beta} \\ + \left(\frac{J}{2N}\right) \sum_{\substack{\underline{k}'\underline{k}'' \\ \alpha'\alpha'' \\ \beta}} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha'\alpha''}^*) \sum_{\underline{k}\sigma, \underline{k}'\alpha', \underline{k}''\alpha''; \beta} \quad (\text{A. 2.1})$$

ここに

$$\sum_{\underline{k}\sigma, \underline{k}'\alpha', \underline{k}''\alpha''; \beta} \equiv \langle B' | a_{\underline{k}\sigma} a_{\underline{k}'\alpha'} a_{\underline{k}''\alpha''}^* a_{\beta}^* | \varphi_0 \rangle \quad (\text{A. 2.1})'$$

$$(E_B + \xi_{\underline{k}_1} + \xi_{\underline{k}_2} - \xi_{\underline{k}_3}) \sum_{\underline{k}_1\sigma_1, \underline{k}_2\sigma_2, \underline{k}_3\sigma_3; r} \\ = \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{\beta} \{ (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma_3\sigma_1}^*) \sum_{\underline{k}_2\sigma_2; \beta} - (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma_3\sigma_2}^*) \sum_{\underline{k}_1\sigma_1; \beta} \} \\ + \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{\underline{k}_1\alpha_1\beta} \{ (-) (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\sigma_1}^*) \sum_{\underline{k}\alpha, \underline{k}_2\sigma_2, \underline{k}_3\sigma_3; \beta} \\ + (-) (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\sigma_2}^*) \sum_{\underline{k}_1\sigma_1, \underline{k}\sigma, \underline{k}_3\sigma_3; \beta} + (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\sigma_3\alpha}^*) \times \\ \times \sum_{\underline{k}_1\sigma_1, \underline{k}_2\sigma_2, \underline{k}\alpha; \beta} \} + \left(-\frac{J}{2N}\right) \sum_{\underline{k}\underline{k}'\alpha\alpha'\beta} (\vec{S}_{\beta r} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha'}) \times \\ \times \langle B' | a_{\underline{k}_1\sigma_1} a_{\underline{k}_2\sigma_2} a_{\underline{k}_3\sigma_3}^* a_{\underline{k}\alpha}^* a_{\underline{k}'\alpha'} a_{\beta}^* | \varphi_0 \rangle \quad (\text{A. 2.2})$$

(A. 1.2) と (A. 2.2) の右辺の最後の項を除くと、二つの振巾の間に次のような関係ある事が判る。

$\underline{k}_1, \underline{k}_2, \underline{k}_3$ の range より拡張した函数 $\sum_{\underline{k}_1\sigma_1, \underline{k}_2\sigma_2, \underline{k}_3\sigma_3}$ と $\underline{k}_1, \underline{k}_2$ の range より拡張した函数 $\Gamma_{\underline{k}_1\sigma_1, \underline{k}_2\sigma_2, \underline{k}_3\sigma_3}$ の間には、

$$\sum_{\substack{\underline{k}_1 \underline{k}_2 \underline{k}_3 \\ \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}} = \Gamma_{\substack{\underline{k}_1 \underline{k}_2 \underline{k}_3 \\ \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3}} \left(\begin{matrix} \xi_j \rightarrow -\xi_j \\ \vec{\sigma} \rightarrow -\vec{\sigma}^* \end{matrix} \right) \quad (\text{A. 2.3})$$

の関係存する。

スピン $\frac{1}{2}$ の時、 $\vec{S}, \vec{\sigma}$ の固有値 $\frac{1}{2}$ には固有函数 $\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}$ の

triplet が, 固有値 $(-\frac{3}{2})$ には singlet $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\beta \\ \alpha \end{pmatrix}$ が存する。 $(-\vec{S} \cdot \vec{\sigma}^*)$ には, 固有値 $\frac{1}{2}$ には $\begin{pmatrix} \beta \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \alpha \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}$ の triplet があり, 固有値 $(-\frac{3}{2})$ には singlet $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ がある。electron hole の state density 同じとすると, 最低近似では, 次のようになる。 $E_B = E_{B'}$ である。

$$(\text{singlet}) (J < 0) |B'\rangle \propto \sum_{k < k_F} \frac{1}{\xi_k + E_B} (a_{k\uparrow}\alpha + a_{k\downarrow}\beta) |\varphi_0\rangle,$$

$$(\text{triplet}) (J > 0) |B'\rangle \propto \sum_{k < k_F} \frac{1}{\xi_k + E_B} (a_{k\uparrow}\alpha - a_{k\downarrow}\beta) |\varphi_0\rangle$$

$$a_{k\uparrow}\beta |\varphi_0\rangle$$

$$a_{k\downarrow}\alpha |\varphi_0\rangle.$$

これで 0 近似で $\xi_k < 0$ で $V_{\sigma\sigma'}(\xi_k) \propto \frac{1}{|\xi_k| - E_B} \delta_{\sigma\sigma'}$ で, $\xi_k > 0$ の $V_{\sigma\sigma'}(\xi_k) \propto \frac{1}{\xi_k - E_B} \delta_{\sigma\sigma'}$ と比較して一般の ξ_k に対して $\frac{1}{|\xi_k| - E_B}$ に比例する。上の, $(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})$ と $(-\vec{S} \cdot \vec{\sigma}^*)$ の関係と (A.2.3) により, 次の近似でも上記のような (2.13) のような関係成立する。多分, 全ての次数について成立つと思われるが, 吟味してない。

(Appendix III)

我々の仮定した $t(z)$ の値を, そのまま二時間グリーン関数の式に表われる $t(z)$ に用いて, 物理量が求まるとする。Yosida-Okiji の論文¹¹⁾ の (A.8) の次のような式を用いる。

$$m_k - \frac{3}{4} = \frac{-\frac{3}{4} + 4(n_k - \frac{1}{2})(n_k - f(\xi_k))}{(1 + 2\pi\rho_1|J| \int R_e G_k(\omega) f(\omega) d\omega)}. \quad (\text{A.3.1})$$

$$m_k - \frac{3}{4} \doteq (-\frac{3}{4}) \frac{1}{1 + 2\pi\rho_1|J| \int R_e G_k(\omega) f(\omega) d\omega}, \quad (\text{A.3.2})$$

とする。高温では

$$2\pi\rho_1|J| \int R_e G_k(\omega) f(\omega) d\omega \doteq \rho_1|J| \log \frac{T}{D}, (\xi_k \doteq 0) \quad (\text{A.3.3})$$

大阪之雄

となる。

$$\xi_k \simeq 0 \text{ で, } G_k(\omega) \doteq \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega - \xi_k} (1 - i\pi\rho t(\omega))$$

の故, (4.1) の仮定を用い

$$R_e G_K(\omega) - (R_e G_k(\omega))_{\text{normal}} \doteq R_e \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \xi_k)} \frac{1}{2} (i-1)$$

とする。 ($|\xi_k| \lesssim |\tilde{E}_B|$ に対して)。

$$\begin{aligned} & 2\pi\rho_1|J| \int_{-|\tilde{E}_B|}^{|\tilde{E}_B|} [R_e G_k(\omega) - (R_e G_k(\omega))_{\text{normal}}] f(\omega) d\omega \\ & \simeq (-) \frac{\rho_1|J|}{2} \ell o g \frac{T}{|\tilde{E}_B|} + O(\rho_1|J|). \end{aligned} \quad (\text{A.3.3})$$

(A.3.3) の $\ell o g$ の前の $\frac{\rho_1|J|}{2}$ の係数は上の粗い計算では信頼性がないとして, $\rho_1|J|$ と考える。すると, $1 + 2\pi\rho_1|J| \int R_e G_k(\omega) f(\omega) d\omega$

$$\begin{aligned} & \simeq 1 + \rho_1|J| \ell o g \frac{|\tilde{E}_B|}{D} \\ & \doteq \frac{1}{\rho_1|J|} \ell o g \frac{|\tilde{E}_B|}{T_k}, \quad (T_k; \text{異常温度}) \end{aligned} \quad (\text{A.3.4})$$

と考える。(A.3.4) を認めれば (4.3) が 0°K で生ずる。

$$\frac{\chi}{\chi_0} = \left[1 - |J|\rho_1 - \frac{|J|}{N} \sum_k m_k \frac{dn_k}{d\xi_k} \right]$$

の Nagaoka の式で, $\sum_k m_k \frac{dn_k}{d\xi_k} \doteq -\rho m_k (\xi_k \simeq 0)$ の近似をして,

(A.3.4) を (A.3.2) に入れると

$$\frac{\chi}{\chi_0} = 1 - \frac{1}{\ell o g \frac{|\tilde{E}_B|}{T_k}}$$

を得る。

(4.4) は $\frac{\chi}{\chi_0} = 1 - \frac{1}{\log \left(\frac{T + |\tilde{E}_B(T)|}{T_k} \right) + 1}$ である。

References

- 1) Y.Nagaoka; P.R.138 A1112('65), P.T.P.371 3('67).
- 2) Hamann; P.R.158 570('67)
D.E.Bloomfield and D.R.Hamann (to be published in P.R)
- 3) A.Yoshimori; (to be published in P.R)
A.Yoshimori and K.Yosida; ISSP. No296 ('68).
- 4) H-Suhl; P.R.138 A515('65), Physics 3 39('65)
P.R.141 483('66); Suhl and D.Wong; Physics 3 1('67)
- 5) Y.Nakaoka; (Effect of the potential Scattering on the low temperature anomalies due to the s-d Interaction)
- 6) J.Kondoh; (On Suhls Theory of Exchange Scattering in Metals)
- 7) Y.Ôsaka; 物性研究 9 125('67)
- 8) S.Nakajima; 物性研究 10 No.3('68)
- 9) H.Ishii and K.Yosida; P.T.P 38 61('67)
H.Ishii. ISSP ('68)
- 10) K.Yosida; P.R.147 223('66) P.T.P 36 875('66)
A.Okiji; P.T.P 36 714('66)
- 11) K.Yosida and A.Okiji; P.T.P 34 505('65)